

磁耦合效应对半无限超晶格中 表面电子态的影响^{*}

黄维清¹⁾²⁾ 陈克求²⁾ 帅志刚^{2)†} 王玲玲¹⁾ 胡望宇¹⁾

¹⁾ 湖南大学应用物理系, 长沙 410082)

²⁾ 中国科学院化学研究所有机固体重点实验室, 北京 100080)

(2003 年 11 月 13 日收到, 2003 年 12 月 9 日收到修改稿)

在有效质量近似理论下, 采用有效垒高方法, 研究了在沿超晶格生长方向加一有限磁场时磁耦合效应对半无限超晶格中表面电子态的影响. 当考虑超晶格中阱层和垒层之间电子有效质量的差别时, 沿超晶格生长方向的磁场将导致磁耦合效应的出现. 研究表明, 磁耦合效应不仅引起表面电子能级的量子化, 而且表面电子能级的大小及其在表面附近的局域程度也依赖于磁场的大小和朗道指数. 此外, 研究表明布洛赫波数的虚部可以作为一个衡量表面电子态局域程度的物理量.

关键词: 超晶格中的电子态, 表面态, 磁场

PACC: 7320D, 7320A, 8760D

1. 引 言

自 1970 年江崎和朱兆祥提出超晶格概念以来, 对低维纳米结构, 如量子点、量子线、量子阱和超晶格等的研究在凝聚态物理和现代高新技术的发展中占有极其重要的地位, 人们对这些结构的物理性质及其应用进行了大量的研究^[1-10], 其中超晶格是研究最多的低维结构之一. 含缺陷的超晶格是近年来提出的一种新型超晶格结构, 它具有理想超晶格所不具备的独特的物理性能, 如: 在子带中形成共振散射态, 或者在能隙中出现局域态. 含缺陷超晶格中的局域声学声子^[11]、局域光学声子^[12]和局域电子态^[13-16]的性质已成为近年来的研究热点之一. 就电子态而言, 大量的研究表明一个理想超晶格中的电子结构由一系列微带和微隙交替组成; 一旦超晶格的严格周期性被破坏, 如掺杂、结构缺陷、表面等, 微隙中将会有电子局域能级存在. 对于一个半无限超晶格, 由于其周期性在表面被中断, 这可能导致表面附近电子局域态的出现. 由于这些局域态主要局域在半无限超晶格的表面附近, 我们也称之为表面电子态(以下简称为表面态). 研究表明表面态能引起很大的斯塔克位移和增强吸收, 所以这样一类结构

可用作理想的光调制和检测器^[17].

近 20 年来, 人们从实验^[18-21]和理论^[16, 22-26]上对超晶格中表面态的性质进行了深入的研究. Ohno 等人^[18, 19]利用光致发光光谱和光电流谱等方法首次观察到了表面态. 通过改变超晶格参数^[22, 23], 改变包覆层的厚度^[24], 或同时改变基底垒高和超晶格参数^[16, 17, 25, 26], 可获得丰富多样的表面能谱. 外场下超晶格中表面态的性质也已被广泛研究: Huang 等人^[27]研究了加电场时半无限超晶格中表面电子态的性质; Akjouj 等人^[28]用一系列交替的方向相反的 δ 函数构建了一个磁性克朗尼克-潘纳模型, 讨论了表面能级随横向波矢的关系, 比较了不同表面能级的态密度在空间的分布; Olendkii 等人^[29]研究了在垂直超晶格生长方向加一有限磁场时有限超晶格中表面电子态的性质, 他们的研究表明微带和表面能级随磁场的增加而升高, 且表面能级升高得更快, 由于他们忽略了阱层和垒层之间电子有效质量的差别, 所以磁耦合效应在这里并没有出现. 最近的研究表明, 考虑非抛物带效应时, 不能忽略超晶格中不同组分层的电子有效质量的差别^[14]. 本文在考虑非抛物带效应下, 采用有效垒高方法研究了沿超晶格生长方向的有限磁场对半无限超晶格中表面态的影

^{*} 国家自然科学基金(批准号 90203015)资助的课题.

[†] E-mail: zgshuai@iccas.ac.cn

响. 本文的结果表明在这样的情形下出现磁耦合效应, 而且这种耦合效应强烈地影响表面态的性质. 本文详细地讨论了这种磁耦合效应对表面电子能级的大小及其在表面附近的局域程度的影响.

2. 模型与公式

考虑磁场 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ 作用于图 1 所示结构: 一个半无限 GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As 超晶格生长在一个均匀半无限 Al_xGa_{1-x}As 基底 s 上, 超晶格由组分层 a 层 (GaAs) 和 b 层 (Al_{0.2}Ga_{0.8}As) 交替组成, 其厚度分别为 W_a 和 W_b , 超晶格的周期为 $W = W_a + W_b$, b 层和基底 s 的势函数分别为 U_b 和 U_s . 选择超晶格的生长方向为 z 方向, 超晶格和基底的界面为坐标原点.

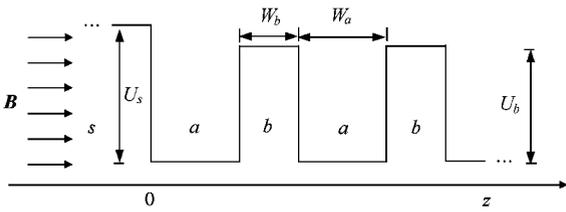


图 1 生长在均匀半无限 Al_xGa_{1-x}As 基底上的 GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As 半无限超晶格导带结构示意图. 超晶格阱层 a 和垒层 b 的厚度分别为 W_a 和 W_b , 垒层 b 和基底 s 的垒高分别为 U_b 和 U_s .

本文主要研究局域在表面 ($z = 0$) 附近的表面电子态的性质. 要得到表面态, 必须要在适当的边界条件下解薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) \right] \psi(z) = E\psi(z), \quad (1)$$

式中 m 为电子有效质量, $U(z)$ 为势函数, E 为表面态的本征能量. 势函数定义为 $U(z) = U_a = \alpha$ 在 a 层和 $U(z) = U_\beta$ ($\beta = b, s$), U_β 为 β 层和 a 层材料的导带带阶之差.

选择磁矢势的对称规范 $\mathbf{A} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2$. 在有效质量近似下, 单电子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m(z)} \left[\left(\hat{p}_x - \frac{eBy}{2} \right)^2 + \left(\hat{p}_y + \frac{eBx}{2} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} \hat{p}_z \frac{\hat{p}_z}{m(z)} + U(z). \quad (2)$$

引进占有数算符 \hat{n} , 电子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \left(\frac{1}{2} + \hat{n} \right) \hbar \omega(z) + \frac{1}{2} \hat{p}_z \frac{1}{m(z)} \hat{p}_z + U(z), \quad (3)$$

式中 $\omega(z) = eB/m(z)$ 为与位置有关的回旋频率. 因

为 $[\hat{n}, \hat{H}] = 0$, 故 \hat{n} 是守恒量, 而朗道能级 $E_n = (1/2 + n)\hbar\omega(z)$ 不是守恒量, \hat{H} 的本征函数可写为

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Theta_n(x, y)\psi(z), \quad (4)$$

$\Theta(x, y)$ 为 \hat{H} 的本征函数. 把方程 (4) 代入本征方程 $\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$, 得到磁场下一维纵向有效质量薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} \psi(z) + U_{\text{eff}}(z)\psi(z) = E_z \psi(z), \quad (5)$$

式中 E_z 为位于阱区的电子纵向能量, $U_{\text{eff}}(z)$ 为有效势垒, 它们的定义分别为

$$E_z = E - \left(\frac{1}{2} + n \right) \frac{\hbar^2 k_n^2(B)}{2m_a}, \quad (6)$$

$$U_{\text{eff}}(z) = \begin{cases} 0 \\ U_0 - \left(1 - \frac{m_a}{m_\beta} \right) \frac{\hbar^2 k_n^2(B)}{2m_a} \end{cases}, \quad (7)$$

式中

$$k_n^2(B) = \frac{2eB}{\hbar} \left(\frac{1}{2} + n \right). \quad (8)$$

方程 (6)–(8) 表明磁耦合效应不仅引起电子的横向运动量子化, 也使电子在运动中所受的有效垒高被量子化.

利用方程 (5) 研究如图 1 所示结构超晶格的表面电子能级. 位于 $nW < z < nW + W_a$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) 的 a 层的电子纵向包络函数为

$$\psi(z) = e^{iq_z(n-1)W} [A_a e^{ik_a(z-z_a^n)} + B_a e^{-ik_a(z-z_a^n)}] \quad (9)$$

在区域 $nW + W_a < z < (n+1)W$ 的 b 层的电子纵向包络函数为

$$\psi(z) = e^{iq_z(n-1)W} [A_b e^{ik_b(z-z_b^n - W_a)} + B_b e^{-ik_b(z-z_b^n - W_a)}], \quad (10)$$

式中 z_a^n 和 z_b^n 分别为界面右边半无限超晶格中第 n 个周期 a 层和 b 层的中心坐标, W 为超晶格的周期, q_z 为衰减常数. 表面态 q_z 的虚部应为正实数. 在基底中, 即 $z < 0$, 指数衰减的表面波函数为

$$\psi(z) = A_s e^{k_s z}. \quad (11)$$

(9)–(11) 式中电子的纵向波数为

$$k_\mu = [2m_\mu (E_z - U_{\mu, \text{eff}}) \hbar^2]^{1/2} \quad (\mu = a, b) \quad (12)$$

和

$$k_s = [2m_s (U_{s, \text{eff}} - E_z) \hbar^2]^{1/2}. \quad (13)$$

对于能级位于微隙中的表面态, 其布洛赫波数 q_z 取

$$q_z = \frac{n\pi}{W} + iq \quad (q > 0, n = 1, 2, 3, \dots), \quad (14)$$

式中 n 为微隙指数. 这里布洛赫波数虚部 q (也叫衰减因子) 反映了表面态在表面附近的局域程度. 根据 Bastard 边界条件: 在每一个界面 $\phi(z)$ 和 $\phi'(z)/m(z)$ 连续, 可以导出:

$$\cos(q_z W) - 0.5(\hat{S}_{11} + \hat{S}_{22}) = 0, \quad (15)$$

$$(F_{ca} + 1) \frac{e^{-iq_z W} - \hat{S}_{11}}{\hat{S}_{12}} - (F_{ca} - 1) e^{-ik_a W_a} = 0, \quad (16)$$

式中

$$F_{ca} = \frac{im_c k_a}{m_a k_c}, \quad (17)$$

$$\hat{S} = \hat{R}^{-1}(m_a, k_a, W_a) \hat{G}(m_b, k_b, W_b) \times \hat{R}(m_a, k_a, -W_a), \quad (18)$$

$$\hat{G}(m, k, z) = \hat{R}(m, k, -z) \hat{R}^{-1}(m, k, z), \quad (19)$$

$$\hat{R}(m, k, z) = \begin{pmatrix} e^{ikz/2} & e^{-ikz/2} \\ (ik/m) e^{ikz/2} & (-ik/m) e^{-ikz/2} \end{pmatrix}. \quad (20)$$

方程 (14)–(16) 确定了微隙中的表面电子能级, 当布洛赫波数 q_z 取实数时, 方程 (14) 和 (15) 确定了超晶格中微带的色散关系.

3. 结果与讨论

本节将运用上面导出的理论公式, 从数值上讨论磁耦合效应对表面电子态的影响. 计算中选取如下参数: $m_a = 0.067m_0$, $m_b = 0.0836m_0$, $m_c = (0.067 + 0.083x)m_0$, $W_a = W_b = 4.0\text{nm}$, $U_a = 0$, $U_b = 188.8\text{meV}$, $U_s = 944x\text{meV}$ 其中 m_0 为自由电子质量^[14].

图 2 给出在零场和磁场下表面电子能级的纵向分量随基底垒高 U_s 的变化关系. 图 2 实线 a1–a3, b1–b3 和 c1–c3 表示表面电子能级, 从下往上的阴影区域分别为微带 1, 2 和 3 (微带 3 只画出了一部分) 空白区域为微隙 1, 2 和 3. 这里特别指出微隙 1 和 3 位于布里渊区的中心, 微隙 2 位于布里渊区的边界. 从图 2 可知, 当基底垒高比超晶格 b 层垒高低 (即 $0 < U_s < U_b$) 时, 仅在第 1 微隙中存在表面态, 且随基底垒高 U_s 的增加迅速向高能区移动. 当基底垒高比超晶格 b 层垒高高 (即 $U_s > U_b$) 时, 在第 2 和第 3 微隙中各出现一支表面态, 其能级随基底垒高 U_s 的增加缓慢地增加. 在零场下, 即不考虑磁耦合效应时 (如图 2(a)), 当 $U_s = 132.16\text{meV}$ 时, 表面态

进入第 1 微带而消失. 第 2 和第 3 微隙分别在 $U_s = 314.64\text{meV}$ 和 $U_s = 440.09\text{meV}$ 时出现表面电子态. 当磁场 $B = 13\text{T}$, 朗道指数为 10 时, 表面态在 $U_s = 126.5\text{meV}$ 时进入第 1 微带, 第 2 和第 3 微隙分别在 $U_s = 377.56\text{meV}$ 和 $U_s = 502.96\text{meV}$ 时出现表面态. 这表明在磁场作用下, 随朗道指数的增加, 在第 1 微隙中表面态消失得更快, 有表面态存在的基底垒高 U_s 的范围变窄. 而在第 2 和第 3 微隙中, 当 U_s 更大时才有表面态出现, 有表面态存在的基底垒高 U_s 的范围也变窄. 在 U_s 变化的过程中, 为什么表面电子态数目发生变化? 对这一问题, 我们从物理上解释如下: 理想超晶格的微带可以看成是由相邻阱间的周期性耦合而导致能级劈裂所形成的, 而对于半无限超晶格, 如本文讨论的结构, 这种周期性耦合在表面附近被中断了, 从而在表面附近产生非周期性耦合, 这种非周期性耦合导致新的能级劈裂, 它不同于周期性耦合所产生的能级劈裂, 某些非周期性耦合劈裂能级可能位于超晶格的微带之中, 从而变成散射态, 而另外一些可能位于微隙之中而变成表面态. 由于基底与半无限超晶格存在耦合作用, 这些非周期性的劈裂能级是否位于微隙之中也依赖于基底的垒高 U_s 的大小, 所以位于微隙中的表面态的数目会随基底垒高 U_s 发生变化, 但总的非周期性耦合的劈裂能级的数目是守恒的. 图 2 也清楚地表明, 磁耦合效应导致 (1) 每一个表面能级分裂成许多局域的子能级, 对应于不同的朗道指数; (2) 随朗道指数的增加, 所有的微带、微隙和表面能级都向低能区域移动, 且微隙变窄, 微带变宽; (3) 这种变化在低能区域比高能区域更快. 根据方程 (6) 和 (7), 可以很好地解释上述现象: 纵向磁场不仅引起电子的横向运动轨道量子化, 形成朗道能级, 而且随磁场 B 和朗道指数 \hat{n} 的增加, 有效垒高变小, 超晶格阱间耦合增强, 从而导致微带变宽, 微隙变窄.

为了讨论表面电子能级在能隙中位置、局域化程度与布洛赫波数虚部 q 的关系, 图 3(a1) 和 (b1) 给出对应于图 2(b) 中第 1 能隙和第 2 能隙中表面态的布洛赫波数的虚部 q 随基底垒高 U_s 的变化规律, 图 3(a2) 和 (b2) 给出取不同 q 时表面态波函数的模的平方. 图 3(a1) 表明第 1 能隙中表面能级的 q 随基底垒高 U_s 的增加而减小, 而从图 3(b1), 可以看到第 2 能隙中表面能级的 q 随基底垒高 U_s 的增加而增加. 从图 3(a2) 和 (b2) 可以看出, 表面电子波函数基本局域在界面附近, 并且基底垒高越高, 波函数在

基底中隧穿概率越小,指数衰减得越快,而以振荡形式向超晶格生长方向衰减.同时,基底垒高比超晶格中垒高越低或越高时,表面能级越靠近能隙的中央(第1能隙的中央可认为在 $E_z = 0$),其布洛赫波数虚部 q 越大,表面态波函数向基底和超晶格中隧穿

概率越小,其局域化程度越高,因此可以通过改变基底垒高来改变表面电子波函数的局域程度,从这一结果,我们也知道布洛赫波数虚部 q 能很好地表征表面电子态的局域程度.

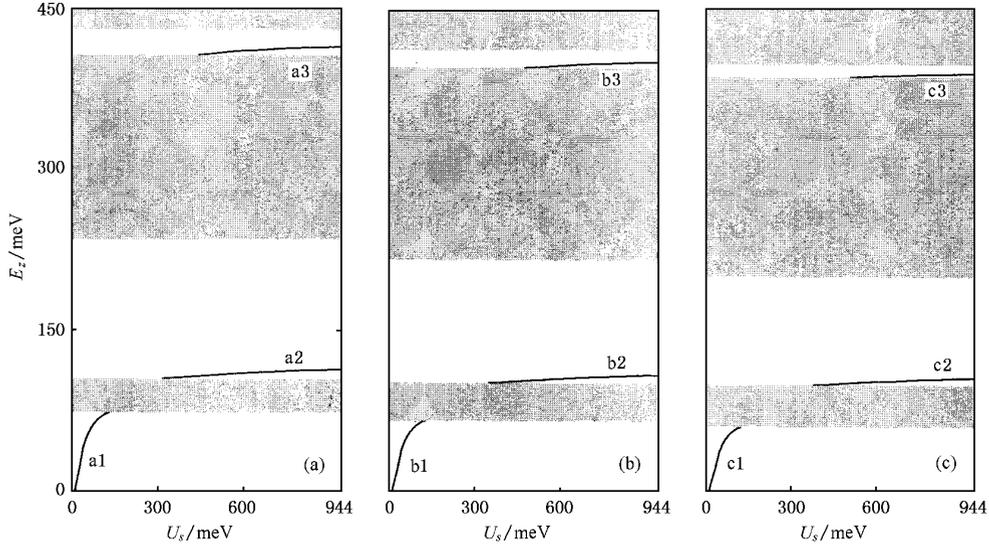


图2 表面电子能级纵向分量随基底垒高的变化关系 (a)为磁场为零 (b)和(c)对应于磁场为13T,朗道指数分别为5和10.阴影区域从下往上分别为微带1,2,3,空白区域为微隙1,2,3,实线a1— a3, b1—b3和c1—c3分别表示相应微隙中的表面能级

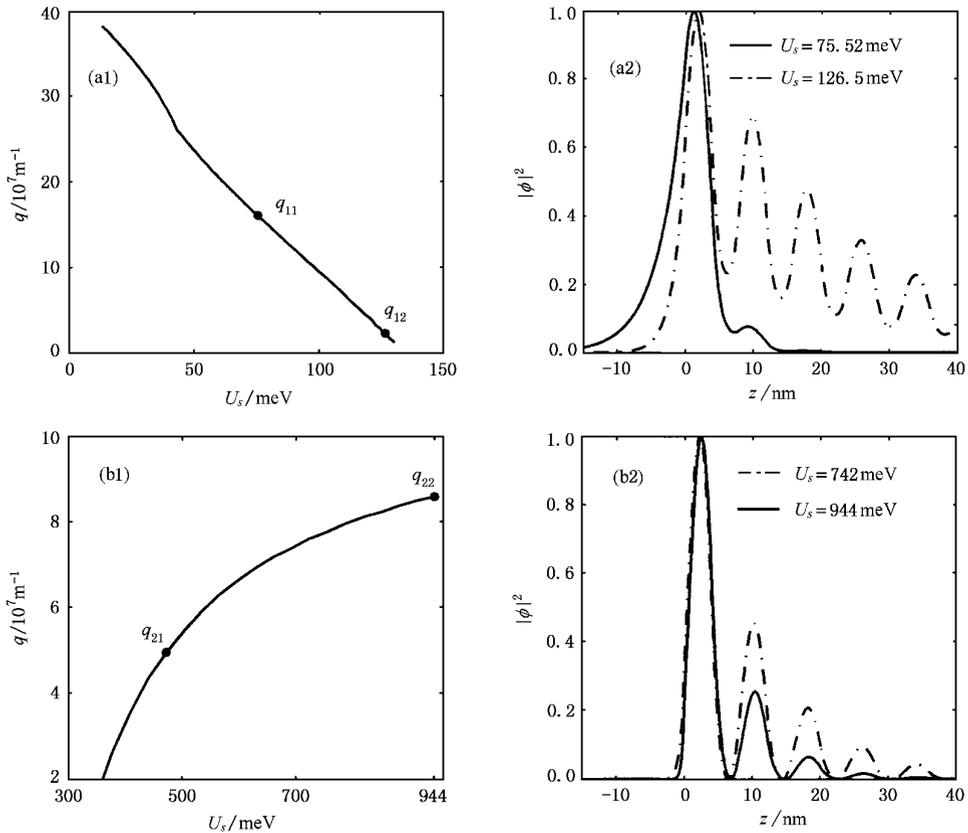


图3 (a1)和(a2)分别对应于图2(a)中第1和第2微隙中表面能级的布洛赫波数虚部 q (b1)和(b2)中实线和点划线分别对应于(a1)和(a2)中点 q_{11} , q_{12} 和 q_{21} , q_{22} 的波函数(波函数的最大值取为1)

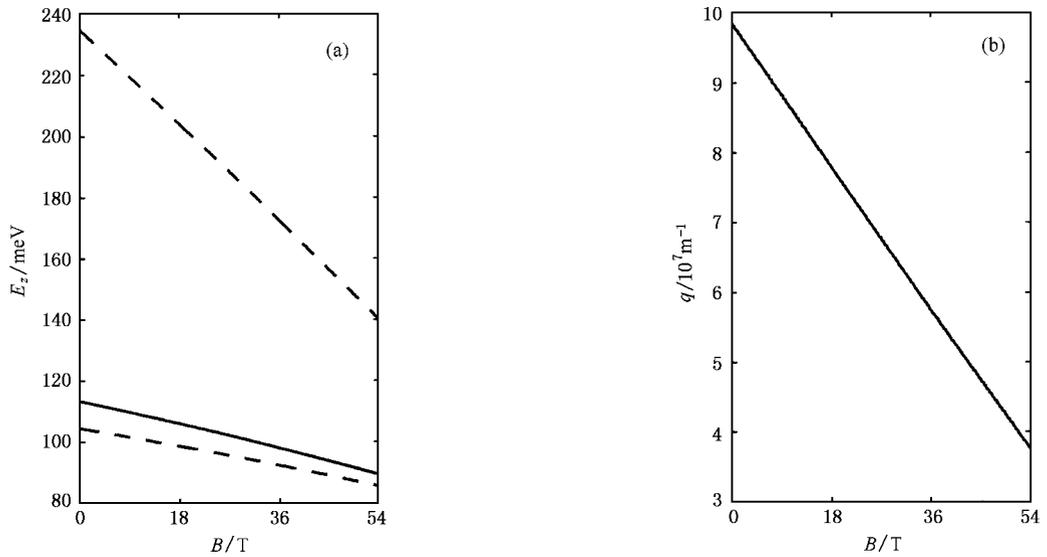


图 4 (a) 表面电子能级能量的纵向分量随磁场的变化关系(两虚线之间区域表示第 2 微隙, 实线表示表面电子能级)(b) 对应(a) 中表面能级的布洛赫波数虚部 q 随磁场的变化关系

图 4 (a) 和 (b) 分别描述了磁场强度对第二微隙中表面电子能级及其布洛赫波数虚部 q 的影响. 计算中所取参数 $U_s = 944 \text{ meV}$ (即 $x = 1.0$), $n = 6$. 从图 4 可以清楚看出, 当朗道指数一定时, 表面电子能级随磁场强度 B 的增加而减小, 同时, 微带、微隙和表面能级都随磁场的增加向低能区域移动, 且高能区域比低能区域变化更快. 表面能级随磁场的增加而靠近微带, 所对应的 q 越小, 说明磁场强度越大, 表面电子态局域程度越低. 我们也研究了其他微隙中表面电子能级和布洛赫波数虚部 q 随磁场强度大小的变化, 可发现类似的现象. 上述结果表明, 表面能级及其局域程度在一定程度上可以通过改变结构参数和调节外加磁场强度的大小来加以调制.

4. 结 论

本文采用有效垒高方法, 研究了考虑由于阱和垒之间电子有效质量的不同而引起的磁耦合效应对半无限半导体超晶格中表面电子态的影响. 结果表明, 随磁场和朗道指数的增加, 微带、微隙和表面电子能级总是单调地朝低能区域迁移, 同时微带增宽, 微隙变窄. 表面电子能级的局域程度随磁场和朗道指数的增加而降低; 布洛赫波数虚部 q 能很好地表征表面电子态的局域程度, 表面能级的布洛赫波数的虚部越大, 其在表面附近的局域程度越高.

- [1] Xia J B and Zhu B F 1997 *Semiconductor Superlattice Physics* (Shanghai: Shanghai Science and Technology Publishing House) (in Chinese) [夏建白、朱邦芬 1997 半导体超晶格物理(上海: 上海科学技术出版社)]
- [2] Zhu B F and Chang Y C 1994 *Phys. Rev. B* **50** 11932
- [3] Xia J B and Li S S 2003 *Phys. Rev. B* **68** 75310
- [4] Zhu J L, Dai Z S and Hu X 2003 *Phys. Rev. B* **68** 45324
- [5] Cahill D G *et al* 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 793
- [6] Wu H B, Chang K and Xia J B 2002 *Phys. Rev. B* **65** 195204
- [7] Zhang A Z *et al* 2001 *Chin. Phys.* **10** 537
- [8] Wang L M, Luo Y, Ma B K and Liu C S 2002 *Chin. Phys.* **11** 812
- [9] Luo X D *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1761 (in Chinese) [罗向东等 2003 物理学报 **52** 1761]
- [10] Liu C S *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2020 (in Chinese) [刘承师等 2003 物理学报 **52** 2020]
- Lin C S *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2027 (in Chinese) [刘承师等 2003 物理学报 **52** 2027]
- [11] Chen K Q *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **61** 12075
- Chen K Q *et al* 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 5113
- [12] Chen K Q *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **62** 9919
- Chen K Q *et al* 2002 *Phys. Rev. B* **65** 153305
- Chen K Q *et al* 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 13761

- Chen K Q *et al* 2002 *Phys. Lett. A* **299** 634
- [13] Indjin D , Milanovic V and Ikonc Z 1995 *Phys. Rev. B* **52** 16762
- [14] Chen K Q , Wang X H and Gu B Y 2000 *Int. J. Mod. Phys. B* **14** 2587
- [15] Kaczynski A , Kucharczyk R and Steslicka M 2002 *Physica E* **13** 59
- [16] Stęślicka M *et al* 2002 *Surf. Sci. Reports* **47** 93
- [17] Bloss W L 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8035
- [18] Ohno H *et al* 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 2555
- [19] Ohno H , Mendez E E , Alexandrou A and Hong J M 1992 *Surf. Sci.* **267** 161
- [20] Agulló-Rueda F , Mendez E E , Ohno H and Hong J M 1990 *Phys. Rev. B* **42** 1470
- [21] Miller T and Chiang T C 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 3339
- [22] Arriaga J , Garcia-Moliner F and Velasco V R 1993 *Prog. Surf. Sci.* **42** 271
- [23] Kucharczyk R *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4589
Kucharczyk R *et al* 2001 *Surf. Sci.* **482-485** 648
- [24] Fafard S 1994 *Phys. Rev. B* **50** 1961
- [25] Ei Boudouti E H *et al* 1997 *Phys. Rev. B* **56** 9603
- [26] Kucharczyk R , Stęślicka M and Djafari-Rouhani B 2000 *Phys. Rev. B* **62** 4549
- [27] Huang F Y *et al* 1992 *J. Appl. Phys.* **71** 524
- [28] Akjouj A and Djafari-Rouhani B 1997 *Solid State Commun.* **103** 161
- [29] Olenskii O 1993 *J. Phys. :Condens. Matter* **5** 5437

Magneto-coupling effect on surface electron states in a semi-infinite superlattice^{*}

Huang Wei-Qing^{1,2)} Chen Ke-Qiu²⁾ Shuai Zhi-Gang²⁾ Wang Ling-Ling¹⁾ Hu Wang-Yu¹⁾

¹⁾*Department of Applied Physics , Hunan University , Changsha 410082 ,China)*

²⁾*Laboratory of Organic Solids , Institute of Chemistry , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100080 ,China)*

(Received 13 November 2003 ; revised manuscript received 9 December 2003)

Abstract

A theoretical study , within the effective-mass approximation , on the coupling effects of applied magnetic fields along the growth direction of the superlattice on the surface electron states in a semi-infinite semiconductor superlattice is presented by using an effective-barrier height method. The coupling effect is necessarily considered when the difference of the electron effective masses between different materials cannot be neglected. Our numerical results show that the magneto-coupling effect brings about not only the splitting of the surface electron levels but also the definite dependence of the surface levels and its localization degree on magnetic fields and Landau indices. Our results also indicate that the imaginary component of Bloch wave number can serve as a measure of the localization degree of the surface electron states.

Keywords : electron states in superlattice , surface states , magnetic field

PACC : 7320D , 7320A , 8760D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No.90203015).